

This Page Is Inserted by IFW Operations
and is not a part of the Official Record

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- BLACK BORDERS
- TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- FADED TEXT
- ILLEGIBLE TEXT
- SKEWED/SLANTED IMAGES
- COLORED PHOTOS
- BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
- GRAY SCALE DOCUMENTS

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

As rescanning documents *will not* correct images,
please do not report the images to the
Image Problem Mailbox.

THIS PAGE BLANK (USPTO)

PCT/JP97/03924

29.10.97

日本国特許庁

PATENT OFFICE
JAPANESE GOVERNMENT

REC'D 06 FEB 1998

WIPO PCT

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されて
いる事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed
with this Office.

出願年月日
Date of Application:

1996年11月 6日

出願番号
Application Number:

平成 8年特許願第294203号

出願人
Applicant(s):

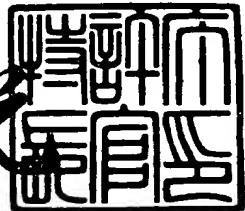
住友化学工業株式会社

PRIORITY DOCUMENT

1998年 1月 23日

特許庁長官
Commissioner,
Patent Office

荒井 寿光



出証番号 出証特平09-3100165

【書類名】 特許願
【整理番号】 147546
【提出日】 平成 8年11月 6日
【あて先】 特許庁長官 荒井 寿光 殿
【国際特許分類】 G01N 9/00
【発明の名称】 有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを
用いた安全性評価方法
【請求項の数】 4
【発明者】
【住所又は居所】 兵庫県宝塚市高司4丁目2番1号 住友化学工業株式会
社内
【氏名】 的場 好英
【発明者】
【住所又は居所】 大阪府大阪市此花区春日出中3丁目1番98号 住友化
学工業株式会社内
【氏名】 松尾 昌▲とし▼
【特許出願人】
【識別番号】 000002093
【氏名又は名称】 住友化学工業株式会社
【代表者】 香西 昭夫
【代理人】
【識別番号】 100080034
【弁理士】
【氏名又は名称】 原 謙三
【電話番号】 06-351-4384
【手数料の表示】
【予納台帳番号】 003229
【納付金額】 21,000円

【提出物件の目録】

【物件名】 明細書 1

【物件名】 図面 1

【物件名】 要約書 1

【包括委任状番号】 9006416

【ブルーフの要否】 要

【書類名】 明細書

【発明の名称】 有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いた安全性評価方法

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

有害生物防除活性化合物を含む溶液を室内空間に噴霧するときに、大・中・小の3種のエアゾール粒子、室内空気、床、天井、及び壁における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立し、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、連立微分方程式の解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測することを特徴とする有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法。

【請求項 2】

上記床の種類が纖維の穂立ちを有する敷物の場合には、上記連立微分方程式に上記敷物の条件に基づく微分方程式を加えることを特徴とする請求項1に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法。

【請求項 3】

有害生物防除活性化合物を含む溶液を室内空間に噴霧するときに、大・中・小の3種のエアゾール粒子、室内空気、床、天井、及び壁における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立し、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、連立微分方程式の解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測し、その後、上記予測結果に基づいて上記溶液を空間噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価することを特徴とする有害生物防除活性化合物の安全性評価方法。

【請求項 4】

有害生物防除活性化合物を含む溶液を室内空間に噴霧するときに、大・中・小の3種のエアゾール粒子、室内空気、床、天井、及び壁における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立し、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得

られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、連立微分方程式の解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測するコンピュータプログラムを記録した記録媒体。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、有害生物防除活性化合物が含まれる薬剤を空間に噴霧した際の化合物の室内挙動を予測する有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法、及びそれを用いて人体に対する安全性を評価する安全性評価方法に関するものである。

【0002】

【従来の技術】

従来から、ハエや蚊等の室内の害虫を駆除するための、缶に封入されたスプレー式の殺虫剤が販売されている。この殺虫剤を室内空間に噴霧した際に、殺虫剤に含まれる有害生物防除活性化合物が室内でどのような振る舞いを示すかが従来より研究されている。

【0003】

このような研究の1つとして、Y.Matoba et al. "A SIMULATION OF INSECTICIDES IN INDOOR AEROSOL SPACE SPRAYING" Chemosphere, Vol.26, No.6, pp1167-1186, 1993に、地球環境における化学物質の振る舞いをシミュレートするFugacityモデルを応用したシミュレーションモデルが記載されている。

【0004】

上記Fugacityモデルは、化学物質がある媒体から他の媒体へ逃げようとする外力、即ち圧力を単位に持つFugacityを用いるものである。例えば化学物質濃度が2つの媒体A, Bで異なっているときに、各媒体における濃度は、

$$N_A / V_A = f_A Z_A$$

$$N_B / V_B = f_B Z_B$$

で表される。ここで、Nは化学的質量、Vは媒体の体積、fはFugacity、及びZは媒体のFugacity capacity である。

【0005】

このとき、媒体A、B間の化学物質の移動(Transference)及び分解 (Degradation)によって質量Nは時間と共に変化する一方、体積V及びFugacity capacity Zを一定と仮定したとき、上記2式は、

$$\begin{aligned} (\text{d } f_A / \text{d } t) V_A Z_A &= \text{d } N_A / \text{d } t \\ &= - (\text{Degradation})_A \pm (\text{Transference})_{AB} \\ (\text{d } f_B / \text{d } t) V_B Z_B &= \text{d } N_B / \text{d } t \\ &= - (\text{Degradation})_B \pm (\text{Transference})_{AB} \end{aligned}$$

と表される。

【0006】

この2つの微分方程式におけるDegradation とTransferenceとが与えられれば、未知のパラメータである f_A 、 f_B を計算で求めることができ、これらにFugacity capacity Z_A 、 Z_B を各々掛けることによって、各媒体における特定期間の化学物質濃度をシミュレートすることが可能となる。

【0007】

上記論文におけるシミュレーションモデルは、このようなFugacityモデルを用いて、大・中・小のエアゾール粒子、空気全体、床、天井、及び壁における殺虫剤のFugacityに関する微分方程式を立て、これら7種の微分方程式を連立して解くことによって、殺虫剤を空間に噴霧したときに殺虫剤に含まれる上記化合物の挙動を予測するものである。このモデルを用いたシミュレーション結果では、化合物の挙動は実際の測定による挙動とほとんど一致していることが確認されている。

【0008】

【発明が解決しようとする課題】

しかしながら、上記シミュレーションモデルでは、微分方程式をどのように解くかは言及されておらず、微分方程式を解くときに設定される微小時間単位は一定値であると考えられる。理論的には、微小時間単位が小さければ計算時間が増大し、大きければ解が収束しなくなる。従って、経時的変化を伴うパラメータを含む微分方程式を解く場合に、解が発散しないように微小時間単位を一定値とす

ると、コンピュータの処理速度が増大するという問題を有している。

【0009】

また、上記シミュレーションモデルでは、人体に対する安全性についての言及も何らなされていない。

【0010】

本発明は、上記従来の問題点を解決するためになされたもので、その目的は、微小時間単位を自動的に設定することによって、連立微分方程式を短時間かつ正確に処理することが可能な有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いた安全性評価方法を提供することにある。

【0011】

【課題を解決するための手段】

上記の目的を達成するために、本発明の請求項1に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、有害生物防除活性化合物を含む溶液を室内空間に噴霧するときに、大・中・小の3種のエアゾール粒子、室内空気、床、天井、及び壁における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立し、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、連立微分方程式の解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測することを特徴としている。

【0012】

上記の方法によれば、環境を7種の媒体と見なし、各媒体における化合物の圧力に関する微分方程式を連立して解くことによって、有害生物防除活性化合物の室内での振る舞いを予測することができる。

【0013】

ここで、上記連立微分方程式を解くときに、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように噴霧後の室内での化合物のマスバランスが常にチェックされて微小時間単位が可変するので、マスバランスの変動が小さい場合には上記微小時間単位が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると微小時間単位が小さく設定されることとなる。つまり、経時的変化を伴うパラメータ

を含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に微小時間単位が設定される。

【0014】

これにより、微小時間単位が一定値であった従来の方法と比べて、コンピュータで上記微分方程式を処理する場合に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

【0015】

請求項2に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、請求項1に記載の方法に加えて、上記床の種類が纖維の穂立ちを有する敷物の場合には、上記連立微分方程式に上記敷物の条件に基づく微分方程式を加えることを特徴としている。

【0016】

上記の方法によれば、床の種類が纖維の穂立ちを有する敷物の場合には、纖維の穂立ち間の空間部分に溶液が溜まることから、平坦な床の場合とは化合物の振る舞いが異なるので、請求項1の連立微分方程式に加えて、敷物における化合物の圧力に関する微分方程式を立てている。これにより、床上に纖維の穂立ちを有する敷物を敷いている場合でも、正確に化合物の挙動を予測することが可能となり、多様なシミュレーションが行える。

【0017】

請求項3に記載の有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、請求項1に記載の室内挙動予測方法による予測結果に基づいて、上記溶液を空間噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価することを特徴としている。

【0018】

上記の方法によれば、請求項1に記載の方法で得られた予測結果を用いているので、短時間、かつ精度良く、有害生物防除活性化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となる。これにより、有害生物防除活性化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

【0019】

尚、請求項4に記載したように、有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法をコンピュータプログラムとして実現することもできる。

【0020】

【発明の実施の形態】

【実施の形態1】

本発明の第1の実施形態について図1ないし図4、図6、及び図7に基づいて説明すれば、以下の通りである。

【0021】

本実施形態にかかる殺虫剤等の薬剤（溶液）に含まれる有害生物防除活性化合物（以下、単に化合物と称する）の室内挙動予測方法では、主に蚊やハエ等の室内の害虫を駆除するために薬剤を空間噴霧した場合の化合物の振る舞いを予測するものである。尚、上記薬剤はピレスロイド系殺虫性化合物及び有機リン系殺虫性化合物を含むすべての殺虫剤等である。

【0022】

まず、環境を、図2に示すように、各々の直径が異なる大粒子（エアゾール粒子）1、中粒子（エアゾール粒子）2、及び小粒子（エアゾール粒子）3と、室内全体の空気4と、床5と、天井6と、壁7との7種の媒体に分類する。

【0023】

粒子を3種に分けるのは、粒子の振る舞いが主にその直径に依存しているためであり、噴霧直後は各粒子は同一箇所に分布するが、時間が経てば、大粒子1はその重さのため床5に近い噴霧領域SZ₁、中粒子2は室内の中間にある噴霧領域SZ₂、そして小粒子3は他の2つの粒子に比べて軽いため天井6に近い噴霧領域SZ₃にそれぞれ分布することになるからである。

【0024】

上記7種の媒体における化合物のFugacityに関する連立微分方程式を立て、これをルンゲクッタジル法を用いて解くことによって、薬剤を室内空間に噴霧した際の薬剤中の化合物の室内挙動、即ち室内における化合物分布の経時的変化を予測解析する。

【0025】

このとき、床5の種類としては、主に畳、フローリング、及びカーペット（敷物）の3種があるので、床種類に応じた微分方程式を立てることとする。本実施形態では、床5を畳とした場合について説明する。

【0026】

図1に基づいて、上記化合物の室内挙動予測方法を説明する。

まず、ステップ（以下、Sと略称する）1で1次条件を入力する。この1次条件は、化合物の物理化学的性質（表1参照）、化合物の室内環境挙動性質（表2参照）、室内環境（表3参照）、製品の性質（表4参照）、及び噴霧条件（表5参照）である。

【0027】

【表1】

化合物の物理化学的性質	記号	数値例
分子量	—	277.23 [g/mole]
比重	ρ	1.33×10^6 [g/m ³]
蒸気圧	P^s	2.85×10^{-2} [Pa]
水溶解度	C^s	5.05×10^{-2} [mole/m ³]
オクタノール／水分配係数	K_{ow}	$10^{3.27}$
融点	T_M	273.45 [K]

【0028】

【表2】

化合物の室内環境挙動性質	記号	数値例
光分解定数 in エタノール粒子	K_i ($i=1, 2, 3$)	8.67×10^{-3} [1/h]
空気	K_4	4.97×10^{-4} [1/h]
床・天井・壁	K_j ($j=5, 6, 7$)	4.58×10^{-3} [1/h]
対空気移動半減期 in 床	τ_5	36.0 [h]
天井	τ_6	43.2 [h]
壁	τ_7	43.2 [h]

【0029】

【表3】

室内環境		記号	数値例
オ イ ル ベ ー ス	部屋の大きさ	V_4	23.3 [m ³]
	温度	T	298 [K]
	相対湿度	ϕ	60 [%RH]
	絶対湿度	H	1.19×10^{-2} [kg-H ₂ O/kg-dry air]
	換気率	G	0.58 [1/h]
	粒子構成溶媒の室内蒸気圧	P_{∞}	0 [Pa]
	空気拡散係数	D_{air}	8.64×10^{-2} [m ² /h]
	粒子構成溶媒成分含有率	—	46 [%] (畳の場合) 4 [%] (フローリングの場合)
水 ベ ス	湿球温度	(T_d)	292.5 [K]
	水の蒸気圧	P_{∞}	1.89×10^3 [Pa]

但し、 $V_4 = L_4 \times W_4 \times$ 高さである。

【0030】

【表4】

製品の性質		記号	数値例
オ イ ル ベ ー ス	化合物含有量 (濃度)	C_a	5×10^3 [g/m ³]
	噴霧割合	—	0.45 [g/sec]
	粒子構成溶媒の性質 蒸気圧	P_d	2.72 [Pa]
		M_d	184.37 [g/mole]
		ρ_d	7.56×10^5 [g/m ³]
	エアゾール粒子の直径 (3種)	d_{01}	60 [μ m]
		d_{02}	20 [μ m]
		d_{03}	5 [μ m]
	エアゾール粒子の分布 (3種)	—	10 [%] (大粒子)
		—	80 [%] (中粒子)
		—	10 [%] (小粒子)
水 ベ ー ス	粒子構成溶媒の性質 蒸気圧	P_d	2.26×10^3 [Pa]
		M_d	18 [g/mole]
		ρ_d	1×10^6 [g/m ³]

【0031】

【表5】

噴霧条件	数値例
噴霧時間	15 [sec]
噴霧高さ	1.6~2.4 [m]

【0032】

尚、表1ないし5における数値例は、夏の典型的な日本のアパートの6階間を想定したものである(図7参照)。

【0033】

次に、上記1次条件を用いて2次条件を計算で求める（S2）。この2次条件には、1次条件のみで求まり、時間的に変化しない一義的要因条件（表6参照）と、時間的な変化を伴う経時的変化条件（表7参照）とがある。これらの計算は後で詳細に説明する。

【0034】

【表6】

一義的要因条件	記号
噴霧直後のエアゾール粒子数	n_{0i} ($i=1, 2, 3$)
エアゾール粒子の蒸発定数	α
製品中の化合物の体積割合	R_a
空気中の化合物の拡散係数	D_{ca}
床・天井・壁の表面積	A_j ($j=5, 6, 7$)
床・天井・壁の拡散係数	D_c
Fugacity capacity	
o_f エアゾール粒子	Z_i ($i=1, 2, 3$)
空気	Z_4
床・天井・壁	Z_j ($j=5, 6, 7$)

【0035】

【表7】

経時的变化条件	記号
エアゾール粒子の直径	d_i ($i=1, 2, 3$)
落下速度	v_i ($i=1, 2, 3$)
浮遊数	n_i ($i=1, 2, 3$)
エアゾールゾーンの幅	L_{zi} ($i=1, 2, 3$)
化合物の移動速度	
in エアゾール粒子	k_i ($i=1, 2, 3$)
空気	k_4
床・天井・壁	k_j ($j=5, 6, 7$)
エアゾール粒子と空気との間の 化合物の移動係数	D_{i4} ($i=1, 2, 3$)
空気と床・天井・壁との間の 化合物の移動係数	D_{4j} ($j=5, 6, 7$)
エアゾール粒子の体積	V_i ($i=1, 2, 3$)
床・天井・壁の体積	V_j ($j=5, 6, 7$)

【0036】

上記2次条件を用いて7種のFugacityを計算する(S3)。即ち、大・中・小粒子1・2・3、空気4、床5、天井6、及び壁7に関する7種の微分方程式を建立し、これをルンゲクッタジル法で解き、7種のFugacityを経時的に算出する。ここで、微分方程式を解くときに設定される予測刻み時間幅(微小時間単位)は、化合物のマスバランスの変動に合わせて自動的に可変して設定されるようになっている。

【0037】

S 4 で、上記算出された大・中・小粒子 1・2・3 の Fugacity (f_i , $i=1,2,3$) 及び空気 4 の Fugacity (f_4) を用いて化合物の経時的室内空气中濃度を、床 5 の Fugacity (f_5) を用いて化合物の床残留量を各々算出する。

【0038】

S 5 で、薬剤を吸入した場合における安全性評価を行うか否かを判断し、吸入における安全性評価を行う場合には、上記経時的室内空气中濃度を用いて、汚染された空気を吸入することによって、どの程度曝露されるかを示す吸入推定曝露量を計算する (S 6)。その後、吸入推定曝露量に基づいて吸入安全係数を算出する (S 7)。S 8 で、国毎に定められた基準値と上記吸入安全係数とを比較し、基準値に対して吸入安全係数が上回れば「安全性に問題なし」との判断を下す。一方、S 8 で基準値に対して吸入安全係数が下回れば、「安全性に問題あり」との判断を下し、S 1 へ戻って例えば、化合物の変更、製剤処方の変更、あるいは使用条件の変更等の 1 次条件の変更を検討する。

【0039】

また、上記 S 5 で吸入における安全性評価でない場合には、薬剤が付着した床 5 に接触することによって皮膚がどの程度曝露されるかを示す経皮推定曝露量を計算する (S 9)。その後、S 10 で経皮における安全性評価を行うか否かを判断し、経皮における安全性評価を行う場合には、上記経皮推定曝露量に基づいて経皮安全係数を算出する (S 11)。S 12 で、吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経皮安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S 12 で安全性に問題がある場合には S 1 に戻って 1 次条件の変更を検討する。

【0040】

また、上記 S 10 で経皮における安全性評価でない場合には、S 13 で上記経皮推定曝露量に基づいて、手等に付着した薬剤が口から入ることによってどの程度曝露されるかを示す経口推定曝露量を計算し (S 13)、続いて、この経口推定曝露量に基づいて経口安全係数を算出する (S 14)。この経口曝露は、特に幼児が薬剤の付着した手を口に入れることによって起こる可能性がある。S 15

で吸入における安全性評価の場合と同様に、国毎に定められた基準値と経口安全係数とを比較することによって安全性を評価する。S 1 5で安全性に問題がある場合にはS 1に戻って1次条件の変更を検討する。

【0041】

最後に、S 8、S 1 2、あるいはS 1 5において、安全であると判断された場合には総合的な安全性の評価を行う。ここでは、先に求められた吸入安全係数、経皮安全係数、及び経口安全係数の各々の逆数の和を求めて、得られた値を逆数にすることにより、総合安全係数を求める（S 1 6）。この総合安全係数を基準値と比較することによって、先の安全性評価と同様の評価を行う（S 1 7）。

【0042】

次に、上記S 2～S 4、S 6、S 7、S 9、S 1 1、S 1 3、及びS 1 4の工程について詳細に説明する。

【0043】

(1) 2次条件計算 (S 2)

上記表6に示した一義的要因条件、及び表7に示した経時的変化条件の計算を説明する。

【0044】

噴霧直後の大・中・小粒子1・2・3の粒子数 (n_{0i} , $i=1,2,3$) は、噴霧割合、噴霧直後の粒子の直径 (d_{0i} , $i=1,2,3$)、粒子の分布（3種）、及び噴霧時間より求められる。この粒子数 (n_{0i}) は、噴霧領域 ($S Z_i$, $i=1,2,3$) の底が床5に到達するまでの間一定である。

【0045】

大・中・小粒子1・2・3の蒸発定数 (α) は、粒子の表面温度 (T_d)、粒子構成溶媒の性質（蒸気圧 P_d 、分子量 M_d 、比重 ρ_d ）、及び室内環境（空気拡散係数 D_{air} 、蒸気圧 P_∞ 、室温 T ）より、

【0046】

【数1】

$$\alpha = \frac{4D_{air}M_d}{R\rho_d} \left(\frac{P_d}{T_d} - \frac{P_\infty}{T^\infty} \right) \dots (1)$$

【0047】

と定義される。但し、Rは気体定数である。

【0048】

尚、前記表3及び表4の上部は空間噴霧エアゾールがオイルベースの場合を例示し、この場合には T_∞ （エアゾール粒子から遠く離れた箇所の温度）や T_d は室温（T）とし、 P_∞ （エアゾール粒子から遠く離れた箇所のオイルの蒸気圧）はゼロとする。

【0049】

また、空間噴霧エアゾールが水ベースの場合には、式（1）の P_d 、 M_d 、 ρ_d 、 T_d 、及び P_∞ は水の性質に基づく値に変更する必要がある。具体的には、室温（T）が298 [K] (=25°C)、相対湿度が60 [%RH] 時の上記要因値を表3及び表4の下部に例示している。

【0050】

尚、 T_d は室温（T）及び絶対湿度（H）に基づき、化学機械の理論と計算（第2版）（亀井三郎編、産業図書）等に記載される「質量基準温度表」から求めることができる。また、 P_d と P_∞ は、以下の式より算出可能である。

【0051】

$$\log_{10} P_d = 10.23 - 1750 / (T_d - 38)$$

$$\log_{10} P_\infty = 8.23 - 1750 / (T - 38) + \log_{10} \psi$$

ここで、 ψ は室内の相対湿度である。

【0052】

大・中・小粒子1・2・3のFugacity capacity (Z_i , $i=1,2,3$) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、融点 (T_M)、及び粒子の表面温度 (T_d) より、

【0053】

【数2】

$$Z_j = \frac{6 \times 10^6}{P_L^s R T_d} \dots (2)$$

$$P_L^s = P^s \exp \{6.79(T_M/T_d - 1)\}$$

【0054】

と表される。ここでは、液体状態の化合物の蒸気圧 (P_L^s) を T_M と T_d を用いて算出しているが、 T_M が得られない場合、 P_L^s は固体状態の化合物の蒸気圧 (P^s) と同じとしてよい。

【0055】

空気4のFugacity capacity (Z_4) は、室温 (T) より、

【0056】

【数3】

$$Z_4 = \frac{1}{R T} \dots (3)$$

【0057】

と表される。

【0058】

床5、天井6、及び壁7のFugacity capacity (Z_j , $j=5,6,7$) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、及びオクタノール／水分配係数 (K_{ow}) より、

【0059】

【数4】

$$Z_j = K_{ow} C^s / P^s \dots (4)$$

【0060】

と表される。尚、床5のFugacity capacity (Z_5) に関しては、床材質に応じ

た粒子構成溶媒成分含有率を、適宜上記式(4)に乗することとする。

【0061】

時間 t での大・中・小粒子 1・2・3 の直径 (d_i , $i=1,2,3$) は、粒子の体積が粒子構成溶媒成分の蒸発により時間と共に小さくなるので、粒子構成溶媒成分が蒸発している間については、噴霧直後 ($t = 0$) の粒子の直径 (d_{0i})、及び式(1)より求まる蒸発定数 (α) を用いて以下の式(5)の通りとなる。

【0062】

【数5】

$$d_i = \sqrt{d_{0i}^2 - 2\alpha t} \quad \cdots (5)$$

$$d_i = \sqrt[3]{R_a} d_{0i} \quad \cdots (5')$$

【0063】

一方、粒子構成溶媒成分がすべて蒸発した後の粒子の直径 (d_i) は、製品中の化合物の体積割合 (R_a) と噴霧直後の粒子の直径 (d_{0i}) とを用いて、上記の式(5')の通りとなる。

【0064】

製品中の化合物の体積割合 (R_a) は、化合物含有量 (C_a) 及び化合物の比重 (ρ) より、 C_a / ρ として表される。

【0065】

粒子構成溶媒成分が蒸発し終わるまでの大・中・小粒子 1・2・3 の落下速度 (v_i , $i=1,2,3$) は、粒子の動きが重力と空気抵抗に支配されているので、粒子構成溶媒の比重 (ρ_d)、及び式(5)より求まる粒子の直径 (d_i) を用いて、ストークスの法則より以下の式(6)となる。

【0066】

【数6】

$$v_i = \frac{\rho_d g S_c}{18 \eta} d_i^2 = \beta d_i^2 = \beta (d_{0i}^2 - 2\alpha t) \dots (6)$$

$$S_c = 1 + \frac{2}{7.6 \times 10^7 d_i} \{ 6.32 + 2.01 \exp(-8.322 \times 10^6 d_i) \} \dots (6')$$

$$v_i = (\rho / \rho_d) \beta d_i^2 \dots (6'')$$

【0067】

但し、 g は重力加速度、 η は空気の粘性率、 S_c はすべり補正係数、及び β は速度係数である。ここで、すべり補正係数 (S_c) は、粒子が小さくなるとストークスの法則に従わなくなるので、これを補正するための係数であり、式 (5) より求まる粒子の直径 (d_i) により上記の式 (6') で示される。

【0068】

一方、粒子構成溶媒成分がすべて蒸発した後の粒子の落下速度 (v_i) は、化合物の比重 (ρ)、粒子構成溶媒の比重 (ρ_d)、速度係数 (β)、及び式 (5') より求まる粒子の直径 (d_i) により上記に示す式 (6'') と表される。

【0069】

噴霧領域 (SZ_i) の底が床 5 に付いた後の大・中・小粒子 1・2・3 の浮遊数 (n_i , $i=1,2,3$) は、噴霧高さ、後述の式 (8) で求まるエアゾールゾーンの幅 (L_{zi})、式 (6) あるいは式 (6'') より求まる粒子の落下速度 (v_i)、及び上記噴霧直後の粒子数 (n_{0i}) より、

【0070】

【数7】

$$n_i = n_{0i} \left[1 - \frac{v_i}{L_{zi}} (t - t_{xi}) \right] \dots (7)$$

【0071】

と表される。但し、 t_{xi} は、噴霧領域 (SZ_i) の底が床 5 に到達するまでの時間であり、 $t < t_{xi}$ である。

【0072】

エアゾールゾーンの幅 (L_{Zi} , $i=1,2,3$) は、噴霧領域 (SZ_i) の底が床5に到達した後の噴霧領域の幅(高さ)のことであり、噴霧領域 (SZ_i) が式(6)あるいは式(6")で求まる粒子の落下速度 (v_i) を変えながら床5に吸収されるので、噴霧高さ及び上記落下速度 (v_i) より、

【0073】

【数8】

$$L_{Zi} = \int_{t_{xi}}^{t_{yi}} v_i \, dt \cdots (8)$$

【0074】

と定義される。但し、 t_{yi} は、噴霧領域 (SZ_i) が床5に完全に吸収されるまでの時間である。

【0075】

大・中・小粒子1・2・3と空気4との間の化合物の移動係数 (D_{i4} , $i=1,2,3$) は、粒子中の化合物の移動速度 (k_i , $i=1,2,3$)、空気中の化合物の移動速度 (k_4)、式(5)あるいは式(5')より求まる直径 (d_i)、式(2) (3)で求まるFugacity capacity (Z_i)、及び (Z_4) より、

【0076】

【数9】

$$D_{i4} = \frac{1}{1/(k_i A_i Z_i) + 1/((k_4 + v_i) A_i Z_4)} \cdots (9)$$

【0077】

となる。

【0078】

ここで、 A_i ($= \pi d_i^2$) は、粒子の表面積である。また、空気中の化合物の移動速度 (k_4) は、換気率 (G) より、 GV_4 / A_4 として示される。粒子中の化合物の移動速度 (k_i) は、空気中の化合物の移動速度 (k_4) より、 $k_4 / 100$ として表される。ここで、上記 A_4 は、図7に示すように、空気4の移動方向(図中矢印方向)に対する部屋の断面積のことである。

【0079】

床5・天井6・壁7中の化合物の移動速度(k_j)は、床5・天井6・壁7中の化合物の拡散係数(D_c)を用いて、 $(D_c/t)^{0.5}$ と表される。ここで、 D_c は以下のようにして算出可能である。即ち、 D_c は空気中の化合物の拡散係数(D_{ca})に 10^{-9} を乗じて求めることが可能であり、 D_{ca} は化合物の性質(構造式、分子量等)から例えば、Wike and Lee Method (Handbook of Chemical Property Estimation Methods, McGraw-Hill Book Company, 1982)に従って、算出可能である。

【0080】

空気4と、床5・天井6・壁7と間の化合物の移動係数(D_{4j} , $j=5,6,7$)は、床5・天井6・壁7の各々における対空気移動半減期(τ_j , $j=5,6,7$)、部屋の大きさ(V_4)、後述の式(12)で求まる床5・天井6・壁7の体積(V_j)、式(3)(4)で求まるFugacity capacity (Z_4)、及び(Z_j)より、以下に示す式(10)の通りとなる。

【0081】

【数10】

$$D_{4j} = \frac{0.693}{\tau_j \{1/(V_4 Z_4) + 1/(V_j Z_j)\}} \dots (10)$$

$$D_{4j} = \frac{1}{1/(k_4 A_j Z_4) + 1/(k_j A_j Z_j)} \dots (10')$$

【0082】

また、上記移動係数(D_{4j})は、空気中の化合物の速度(k_4)、床5・天井6・壁7中の化合物の速度(k_j)、床5・天井6・壁7の表面積(A_j , $j=5,6,7$)、及び式(3)(4)で求まるFugacity capacity (Z_4) (Z_j)より、上記式(10')に示す式によっても求めることが可能である。上記床5、天井6、及び壁7の表面積(A_j)は、それぞれ部屋の大きさ($V_4 = L_4 \times W_4 \times$ 高さ)より求められる。

【0083】

尚、式(10)における対空気移動半減期(τ_j)は実測することが難しく、また様々な条件下で値が異なるため、正確な値を求めることが困難である。これに対して、式(10')におけるすべてのパラメータは、測定を必要とせず、計算によって容易に求めることができる。従って、移動係数(D_{4j})は、式(10)よりも式(10')で求める方が好ましい。

【0084】

大・中・小粒子1・2・3の体積(V_i , $i=1,2,3$)は、式(5)あるいは式(5')より求まる粒子の直径(d_i)を用いて、

【0085】

【数11】

$$V_i = \frac{\pi}{6} d_i^3 \dots (11)$$

【0086】

と表される。

【0087】

床5、天井6、及び壁7の体積(V_j , $j=5,6,7$)は、薬剤が噴霧される前の床5・天井6・壁7を薄い膜状のものと考え、薬剤がそれらの膜にしみ込むにつれてその厚みが増して体積が増加するものと考えると、上記床5・天井6・壁7の表面積(A_j)及び床5・天井6・壁7中の化合物の拡散係数(D_c)より、

【0088】

【数12】

$$V_j = 2\sqrt{D_c t} A_j \dots (12)$$

【0089】

となる。

【0090】

(2) Fugacity計算(S3)

大・中・小粒子1・2・3中の化合物の振る舞いは、Fugacity(f_i)に関する

る微分方程式として、

【0091】

【数13】

$$\frac{df_i}{dt} V_i Z_i = \frac{\pi}{2} \alpha d_i Z_i f_i - D_{i4} (f_i - f_4) - K_i V_i Z_i f_i \dots (13)$$

F-change V-change Transference(4) Degradation

【0092】

と表される。ここで、V-changeの項は大・中・小粒子1・2・3の体積変化（時間と共に減少）を、Transference(4)の項は粒子と空気4との間における化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化を各々表している。このとき、前記表2に示すような光分解定数の内、空気中の化合物の分解定数(K_4)は、実測が難しく、この値を決定するのは容易でないことが多い。そこで、実測値が入手できない場合、化合物の構造式を用いて、Atmospheric Oxidation program (Atkinson et al., 1984, Chem. Rev. Vol.84, pp437-470) で算出し求める方法もある。また、粒子中並びに内装材（床5・天井6・壁7）中の光分解定数については、実測値が入手できない場合、居住者の安全性を見込みゼロとすることも可能である。尚、V-changeの項は粒子構成溶媒成分が蒸発している間のみ有効であり、Fugacity (f_i) は噴霧領域 ($S Z_i$) が存在している間有効である。

【0093】

空気中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_4) に関する微分方程式として、

【0094】

【数14】

$$\frac{df_4}{dt} V_4 Z_4 = -G Z_4 f_4 - \sum_{i=1}^3 n_i D_{i4} (f_4 - f_i) - \sum_{j=5}^7 D_{4j} (f_4 - f_j) - K_4 V_4 Z_4 f_4 \dots (14)$$

F-change Ventilation Transference(i) Transference(j) Degradation

【0095】

と表される。ここで、Ventilationの項は化合物の室内からの排出量を、Transference(i)の項は空気4と粒子との間における化合物の移動量を、Transference

(j) の項は空気 4 と床 5・天井 6・壁 7との間における化合物の移動量を、Degradation の項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。

【0096】

床 5、天井 6、及び壁 7 中の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_5) (f_6) (f_7) に関する微分方程式として、それぞれ、

【0097】

【数15】

$$\frac{df_5}{dt} V_5 Z_5 = \sqrt{D_c/t} A_5 Z_5 f_5 + \sum_{i=1}^3 \frac{n_{0i}}{L_{zi}} V_i V_i Z_i f_i - D_{45}(f_5 - f_4) - K_5 V_5 Z_5 f_5 \quad (15)$$

F-change V-change Deposition(i) Transference(4) Degradation

【0098】

【数16】

$$\frac{df_6}{dt} V_6 Z_6 = \sqrt{D_c/t} A_6 Z_6 f_6 - D_{46}(f_6 - f_4) - K_6 V_6 Z_6 f_6 \dots (16)$$

F-change V-change Transference(4) Degradation

【0099】

【数17】

$$\frac{df_7}{dt} V_7 Z_7 = \sqrt{D_c/t} A_7 Z_7 f_7 - D_{47}(f_7 - f_4) - K_7 V_7 Z_7 f_7 \dots (17)$$

F-change V-change Transference(4) Degradation

【0100】

と表される。ここで、各式のV-changeの項は床 5・天井 6・壁 7の体積変化（時間と共に増加）を、Transference(4) の項は床 5、天井 6、あるいは壁 7と空気 4との間における化合物の移動量を、Degradation の項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。また、Deposition(i) の項は粒子の落下に伴う付着を示している。

【0101】

上記式 (13) ないし (17) の 7種の微分方程式を連立してルンゲクッタジル法にて解くことにより、Fugacity ($f_1 \sim f_7$) を算出する。

【0102】

この連立微分方程式を解くときに、予測刻み時間幅 (dt) を設定する必要がある。つまり、予測刻み時間幅は、まず時間 (t_0) での連立微分方程式の解を求め、次に予測刻み時間幅を加えた ($t_0 + dt$) 時間での微分方程式の解を求める事であり、予測刻み時間幅を次々と加えながら解を得ることによって経時的に変化するFugacityが求められる。理論的には、上記予測刻み時間幅の設定時間が小さければ小さいほど正確な解を得ることができるが、計算時間が非常に長くなる。逆に、設定時間が大き過ぎると解が発散して、解に誤りが生じ易くなる。

【0103】

そこで、本願発明では、非常に大きな変化が薬剤に起こるときには予測刻み時間幅が小さく設定されるように、逆に大きな変化がない場合には予測刻み時間幅が大きく設定されるようにしている。

【0104】

具体的には、薬剤の投入量と得られた解とが合致するように常にマスバランスを確認し、マスバランスが大きく変動しない場合には予測刻み時間幅を大きく、マスバランスが変動し始める場合には予測刻み時間幅を小さくする。例えば、マスバランスの変動を±5%の精度に設定すると、

$$\text{化合物投入量} / (\text{存在量} + \text{分解量} + \text{排出量}) = 0.95 \sim 1.05$$

の関係が常に満たされるように、即ちマスバランスの変動が±5%の範囲内に納まるように予測刻み時間幅を絶えず設定する。

【0105】

ここで、上記化合物投入量は、化合物含有量 (C_a) 、噴霧割合、及び噴霧時間より求められる。また、存在量は、連立微分方程式で7種の媒体中の経時的な化合物量が求められるので、それらを合計して以下のように算出する。

【0106】

【数18】

$$\left. \begin{aligned}
 \text{存在量} &= \sum_{i=1}^3 n_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 f_k V_k Z_k \\
 \text{分解量} &= \sum_{i=1}^3 n_i K_i f_i V_i Z_i + \sum_{k=4}^7 K_k f_k V_k Z_k \\
 \text{排出量} &= G Z_4 f_4
 \end{aligned} \right\} \cdots (18)$$

【0107】

分解量及び排出量も上記に示す通りである。

【0108】

図6のフローチャートに基づいて、この予測刻み時間幅 (d t) の設定方法を説明する。

【0109】

まず、予測刻み時間幅 (d t) の初期値を入力し (S21)、次にマスバランスの差の上限である上限設定値 (例えば 0.1 [%])、及びマスバランスの差の下限である下限設定値 (例えば 10^{-6} [%]) を入力する (S22)。その後、 $t = t_0$ のFugacity及びマスバランスを計算し (S23・S24)、 $t = t + d t$ (あるいは $t_0 + d t$) のFugacity及びマスバランスを計算する (S25・S26)。

【0110】

マスバランスの変動が±5%の範囲内であるかどうかを確認し (S27)、マスバランスの変動が±5%の範囲内であれば、 $t = t$ (あるいは t_0) のマスバランスと、 $t = t + d t$ (あるいは $t_0 + d t$) のマスバランスとの差が上限設定値以上であるか否かを判断する (S28)。S28で上限設定値以上であれば、予測刻み時間幅 (d t) を小さくした方が解が正確になるので、予測刻み時間幅 (d t) を1/2倍して設定を変更し (S29)、S28で上限設定値より小さければS30で $t = t$ (あるいは t_0) のマスバランスと、 $t = t + d t$ (あ

るいは $t_0 + dt$ のマスバランスとの差が下限設定値以下であるか否かを判断する。

【0111】

S30でマスバランスの差が下限設定値以下であれば、予測刻み時間幅 (dt) を大きくしても解には影響を及ぼさないので、予測刻み時間幅 (dt) を2倍して設定を変更し (S31)、次に、S31で変更した予測刻み時間幅 (dt) が予測刻み時間幅 (dt) の最大値 (例えば、0.1 [hour]) 以下であるか否かを判断する (S32)。S32で予測刻み時間幅 (dt) が最大値以下の場合には、解は発散しないので、S31で設定した予測刻み時間幅 (dt) を用いる。一方、S32で予測刻み時間幅 (dt) が最大値より大きい場合には解が発散する可能性があるので、予測刻み時間幅 (dt) を最大値に設定し直す (S33)。また、上記S30において、マスバランスの差が下限設定値よりも大きければ、即ち下限設定値と上限設定値との間にあれば予測刻み時間幅 (dt) は変更せずに計算を続ける。

【0112】

上記S29、S30、S32、あるいはS33の工程を経ると、S25へ戻つて再び計算を行い、目的の時間に達するまで上記工程を繰り返す。

【0113】

一方、S27において、マスバランスの変動が±5%の範囲を越えると、マスバランスの変動が大きいので、変動が±5%の範囲内の場合と比較して予測刻み時間幅 (dt) を小さくして計算を行った方がよい。従って、一旦計算を中止し (S34)、下限設定値を小さく設定し直してから (S35)、S23の工程へ戻る。

【0114】

このように、予測刻み時間幅を一定値にすることなく、マスバランスの変動をチェックしながら予測刻み時間幅を可変設定することにより、正確に、かつ効率よくFugacityを算出することが可能となる。

【0115】

(3) 経時的室内空气中濃度及び床残留量算出 (S4)

化合物の経時的室内空气中濃度は、上記(2)項目で求められた大・中・小粒子1・2・3のFugacity (f_i) にそれらのFugacity capacity (Z_i) を掛けたものと、空気4のFugacity (f_4) に空気4のFugacity capacity (Z_4) を掛けたものとを足し合わせることによって算出される。尚、薬剤の種類によっては大粒子1や中粒子2が人体に吸入される恐れがあるものがあるが、その場合には例えば小粒子3のみのFugacity (f_3) を用いて計算すればよい。

【0116】

化合物の床残留量は、床5のFugacity (f_5) に床5のFugacity capacity (Z_5) を掛けることによって算出される。

【0117】

(4) 吸入推定曝露量及び吸入安全係数計算 (S6・S7)

前述した経時的室内空气中濃度は、例えば図3(a)に示すような曲線を描く。この濃度曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積濃度を求め(図3(b)参照)、この値から平均室内空气中濃度を算出する。尚、上記特定期間は目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

【0118】

次に、上記平均室内空气中濃度、呼吸量、及び曝露時間に基づいて、吸入推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{吸入推定曝露量 [mg/kg/day]} = \text{平均室内空气中濃度 [mg/m}^3] \times \\ \text{呼吸量 [m}^3/\text{kg/min}] \times \text{曝露時間 [min/day]}$$

の計算を行う。ここで、上記呼吸量は文献値あるいは実測値を用いればよい。また、大人と子供とに呼吸量を分けて考慮すれば、さらに適切な吸入推定曝露量を得ることができる。

【0119】

吸入安全係数は、予め動物実験により調べられた吸入毒性に関する無影響量と、先に求められた吸入推定曝露量とから算出される。即ち、

$$\text{吸入安全係数} = \text{吸入無影響量 mg/kg/day} / \text{吸入推定曝露量 mg/kg/day}$$

で表される。

【0120】

(5) 経皮推定曝露量及び経皮安全係数計算 (S9・S11)

前述の床残留量は、例えば図4 (a) に示すような曲線を描く。この残留量曲線を積分し、特定期間 ($t_1 \sim t_2$) における化合物の蓄積残留量を求め (図4 (b) 参照)、この値から平均床残留量を算出する。尚、上記特定期間は、目的に応じて任意の期間が設定されるが、通常、その製品の使用方法と毒性データの試験期間を考慮し、適切な期間を設定する。

【0121】

次に、平均床残留量、皮膚付着率、接触面積、及び体重に基づいて、経皮推定曝露量を求める。即ち、

$$\text{経皮推定曝露量 } [\text{mg/kg/day}] = (\text{平均床残留量 } [\text{mg/m}^3]) \times \\ \text{皮膚付着率 } [\%] \times \text{接触面積 } [\text{m}^2/\text{day}] / \text{体重 } [\text{kg}]$$

の計算を行う。ここで、上記接触面積は文献値 (例えば、4 [m^2/day]) を用いればよい。また、皮膚付着率は化合物の存在する床に皮膚が接触した場合に、化合物が皮膚に付着する割合のことであり、この値は文献値あるいはモデル実験値を用いればよい。

【0122】

上記皮膚付着率のモデル実験方法は、次の通りである。幼児が床に接する圧力と同様の圧力で、デニムの布 ($8\text{cm} \times 10\text{cm}$) の上に重し ($8\text{cm} \times 8\text{cm} \times 8\text{cm}$; 4.2kg) を載せ、幼児が動くような速さ ($120\text{cm}/15\text{sec}$) でデニムの布を床上で引っ張る。このデニムと床を分析することにより、デニム及び床に含有される化合物を算出し、その比から皮膚付着率を求める。尚、この方法で得た皮膚付着率は、実際に手を床に押し付けて、手と床の分析値から求めた皮膚付着率と同等か、あるいは若干高めであることが確認されており、居住者の曝露評価を行う上でこのモデル実験方法は有用であることが確認された。

【0123】

次に、経皮安全係数は、予め動物実験により調べられた経皮毒性に関する無影響量と、先に求められた経皮推定曝露量とから算出される。即ち、

$$\text{経皮安全係数} = \text{経皮無影響量 } \text{mg/kg/day} / \text{経皮推定曝露量 } \text{mg/kg/day}$$

で表される。

【0124】

しかしながら、一般に経皮無影響量はあまり求められておらず、文献値も多くない。従って、経皮安全係数を、経皮推定曝露量と、文献値が多数存在する経口無影響量及び経皮吸収率を用いて、以下の式に基づいて求める方がより正確な値を求めることができる。

【0125】

経皮安全係数 = 経口無影響量 [mg/kg/day] /

(経皮推定曝露量 [mg/kg/day] × 経皮吸収率 [%])

ここで、経皮吸収率が不明の場合には、通常、国別のガイドライン（例えば10%）があり、これを用いればよい。

【0126】

(6) 経口推定曝露量及び経口安全係数計算 (S13・S14)

上記(5)項目で得られた経皮推定曝露量、手表面積比、及び口移行率に基づいて、経口推定曝露量を求める。即ち、

経口推定曝露量 [mg/kg/day] = 経皮推定曝露量 [mg/kg/day] ×

手表面積比 [%] × 口移行率 [%]

の計算を行う。ここで、上記手表面積比は（手表面積／体表面積）で表され、その値は文献値（例えば、5 [%]）を用いればよい。また、口移行率は仮定値であり、例えば100%とする。

【0127】

次に、経口安全係数は、予め動物実験により調べられた経口毒性に関する無影響量と、先に求められた経口推定曝露量とから算出される。即ち、

経口安全係数 = 経口無影響量 mg/kg/day / 経口推定曝露量 mg/kg/day

で表される。

【0128】

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、上記化合物を含む薬剤を空間噴霧したときに、大・中・小粒子1・2・3・空気4、床5、天井6、及び壁7のFugacityに関する微分方程式を建立して解

き、その解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測するものである。このとき、予測刻み時間幅は、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定される。

【0129】

従って、連立微分方程式を解くときに、化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように噴霧後の化合物のマスバランスが常にチェックされて予測刻み時間幅が可変するので、マスバランスの変動が小さいときには上記予測刻み時間幅が大きく設定され、マスバランスの変動が大きくなり始めると予測刻み時間幅が小さく設定されることとなる。つまり、経時的変化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に予測刻み時間幅が設定される。これにより、コンピュータで処理する際に、短時間で正確な解を得ることが可能となる。

【0130】

また、本実施形態における有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、上記予測結果を用いて、薬剤を空間噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価するものである。

【0131】

従って、短時間、かつ精度良く、化合物の人体に対する安全性を評価することが可能となる。これにより、化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなる。

【0132】

尚、本実施形態では、床5の種類を畳としたが、フローリングの場合も上記と同様の微分方程式を立てればよい。但し、式(4)の床5のFugacity capacity (Z_5) を求める際に、粒子構成溶媒成分含有率(表3参照)を畳からフローリングのものに変更する必要がある。

【0133】

また、本実施形態では、ルンゲクッタジル法を用いてFugacityを求めたが、他

の方法を用いて微分方程式を解くこともできる。しかしながら、ルンゲクッタジル法を用いると、上述した微分方程式のプログラムをBasicで容易に組むことができる望ましい。また、ルンゲクッタジル法以外で微分方程式を解く際にも、前述のように、予測刻み時間幅を設定することにより、同様の効果を得ることが可能である。

【0134】

【実施の形態2】

本発明の第2の実施形態について図1及び図5に基づいて説明すれば、以下の通りである。なお、説明の便宜上、前記の実施の形態の図面に示した部材と同一の部材には同一の符号を付記し、その説明を省略する。ここでは、床の種類をカーペットとした場合について説明し、実施形態1と異なる部分のみの説明を行う。

【0135】

まず、カーペットを図5に示すようにモデル化する。つまり、カーペットを、基材の上に植設された複数のカーペット繊維（繊維の穂立ち）とそれらの繊維間に存在する空間部分とに分ける。このようなカーペットが床全面に敷かれた部屋で薬剤を空間噴霧すると、粒子がカーペット上に落下し、上記カーペット繊維には薬剤がしみ込むと共に、空間部分には薬剤が溜まることになる。

【0136】

本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法も、図1のフローチャートにしたがうが、S1では、1次条件として、実施形態1の1次条件（表1～表5参照）に、表8に示すカーペット関連1次条件が追加される。尚、カーペットの空間部分の断面積（ A_c ）は、空間部分が室内空気と接触する面積のことである（図5参照）。

【0137】

【表8】

カーペット関連1次条件	記号	数値例
カーペット		
カーペットの空間部分の断面積	A_c	1.6×10^{-3} [m ² /m ² 床]
カーペット 繊維が空間部分の化合物と接触する面積	A_{c5}	0.192 [m ² /m ² 床]
カーペット 繊維が化合物と接触する面積	A_{a5}	1.19 [m ² /m ² 床]
製品の性質		
製品中に含まれる溶剤 (Xylene) の含有率	C_{sd}	
製品の希釈倍率	X_{sol}	

【0138】

尚、表8における数値例は、図5に示す数値に基づいたものである。ここでは、1つの空間部分を 0.1 [mm] \times 0.1 [mm] \times 3 [mm]、1角のカーペット繊維を 2.5 [mm] \times 2.5 [mm] \times 3 [mm] の大きさとしている。また、 1 [cm²] 中に16 [個] のカーペット繊維があるものとする。

【0139】

この場合には、各パラメータは、

$$A_c = (0.1 \text{ [mm]} \times 0.1 \text{ [mm]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ = 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床}]$$

$$A_{c5} = (0.1 \text{ [mm]} \times 3 \text{ [mm]} \times 4 \text{ [面]} \times 16 \text{ [個]}) / 1 \text{ [cm]} \\ = 0.192 \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床}]$$

$$A_5 = 1 - A_c \\ = 1 - 1.6 \times 10^{-3} \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床}]$$

$$A_{a5} = A_5 + A_{c5} \\ = 1.19 \text{ [m}^2/\text{m}^2\text{床}]$$

と求めることができる。ここで、 A_5 は $1 \text{ [m}^2]$ 中のカーペット纖維が室内空気と接する面積のことである。

【0140】

S 2における2次条件としては、実施形態1の2次条件に、表9に示すカーペット関連2次条件が追加される。尚、 k_5 及び V_5 は、実施形態1（表7参照）では床中の化合物の移動速度及び床の体積であったが、各々カーペット纖維内の化合物の移動速度及びカーペットの全纖維の体積に置換することとする。

【0141】

【表9】

カーペット関連2次条件	記号
一義的要因条件	
空間部分の薬剤の蒸発定数	R_d
空間部分の温度 (T_d) での湿度	H_m
カーペットの全纖維の体積	V_s
製品中の化合物の移動速度	k_c
製品の性質変化定数	a
経時的变化条件	
空間部分の薬剤と空気との間の 化合物の移動係数	D_{c4}
空間部分の薬剤とカーペット纖維との間の 化合物の移動係数	D_{c5}
空間部分の薬剤の体積	V_c
空間部分の薬剤のFugacity capacity	Z_c

【0142】

上記表9に示した一義的要因条件、及び経時的变化条件の算出法を、水性エアゾール使用の場合、即ち粒子構成溶媒が水の場合を例にして以下に説明する。

【0143】

カーペットの空間部分に入り込んだ薬剤の蒸発定数 (R_d) は、空間部分の断面積 (A_c) 、室温 (T) 、及び湿度 (H) より、

【0144】

【数19】

$$R_d = A_c h (H_m - H) / C_H \cdots (19)$$

$$C_H = 0.24 + 0.46H$$

$$h = 3.06 \times 10^{-4} (T - T_d)^{1/3}$$

【0145】

と表される。ここで、 T_d はカーペットの空間部分の温度（湿球温度に相当）であり、 H_m は T_d における空間部分の湿度（湿球温度での飽和湿度に相当）である。尚、 T_d 及び H_m は、室温（T）及び湿度（H）に基づき、前述の「質量基準湿度表」から求めることができる。オイルベースの製品（エアゾール）の場合、水とオイルの性質を比較し、 R_d に乘じて薬剤の蒸発定数を算出することができるが、オイルの蒸発が遅い場合 $R_d = 0$ としてもよい。

【0146】

カーペットの全纖維の体積（ V_5 ）は、拡散係数（ D_c ）及びカーペット纖維が化合物と接触する面積（ A_{a5} ）に基づいて、

【0147】

【数20】

$$V_5 = 2\sqrt{D_c t} A_{a5} \cdots (20)$$

【0148】

として求められる。

【0149】

製品中の化合物の移動速度（ k_c ）は、室内空気における化合物の移動速度を示す k_4 （= $G V_4 / A_4$ ）を用いて、 $k_4 / 100$ と表される。

【0150】

カーペットの空間部分の薬剤と空気との間の化合物の移動係数（ D_{c4} ）は、上記製品中の化合物の移動速度（ k_c ）、室内空気における化合物の移動速度（ k_4 ）、床の寸法（ $L_4 \times W_4$ ）、空間部分の断面積（ A_c ）、後述の式（23）

で求められる空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c)、及び実施形態1の式(3)で求められる空気のFugacity capacity (Z_4)より、

【0151】

【数21】

$$D_{c4} = \frac{1}{1/(k_c A_c L_4 W_4 Z_c) + 1/(k_4 A_c L_4 W_4 Z_4)} \dots (21)$$

【0152】

と表される。

【0153】

空間部分の薬剤とカーペット繊維との間の化合物の移動係数 (D_{c5}) は、製品中の化合物の移動速度 (k_c)、拡散係数 (D_c)、床の寸法 ($L_4 \times W_4$)、カーペット繊維が空間部分における化合物と接触する面積 (A_{c5})、空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c)、及び実施形態1の式(4)で求められる床のFugacity capacity (Z_5)より、

【0154】

【数22】

$$D_{c5} = \frac{1}{1/(k_c A_{c5} L_4 W_4 Z_c) + 1/(k_5 A_{c5} L_4 W_4 Z_5)} \dots (22)$$

【0155】

と表される。但し、カーペット繊維内の化合物の移動速度 (k_5) は、 $(D_c / t)^{0.5}$ と表される。

【0156】

空間部分の薬剤の体積 (V_c) は、床の寸法 ($L_4 \times W_4$)、噴霧割合、製品中に含まれる溶剤 (Xylene) の含有率 (C_{sd})、製品の希釈倍率 (X_{sol})、及び式(19)で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d) より求まる。

【0157】

空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c) は、化合物の蒸気圧 (P^s)、水溶解度 (C^s)、オクタノール/水分配係数 (K_{ow})、及び製品の性質変化定数 (a) より、

【0158】

【数23】

$$Z_c = (e^{-at} K_{ow} + 1 - e^{-at}) C^s / P^s \cdots (23)$$

【0159】

と表される。

【0160】

ここで、製品の性質変化定数 (a) は、式 (19) で求められる空間部分の薬剤の蒸発定数 (R_d) 、製品中に含まれる溶剤 (Xylene) の含有率 (C_{sd}) 、及び製品の希釈倍率 (X_{sol}) に基づき算出することができる。即ち、空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c) は、

$$Z_c = \{ (\text{製品中の有機溶剤の比率}) K_{ow} + (\text{製品中の水の比率}) \} \times C^s / P^s$$

とも表され、この式と前記式 (23) とを連立することにより、製品の性質変化定数 (a) が算出される。尚、オイルベースの製品 (エアゾール) の場合、空間部分の薬剤のFugacity capacity (Z_c) は、化合物の蒸気圧 (P^s) 、水溶解度 (C^s) 、オクタノール／水分配係数 (K_{ow}) により、実施形態 1 の式 (4) で与えられる。

【0161】

これにより、カーペットの空間部分の化合物の振る舞いは、Fugacity (f_c) に関する微分方程式として、

【0162】

【数24】

$$\frac{df_c}{dt} V_c Z_c = \sum_{i=1}^3 n_i v_i A_c V_i Z_i f_i / L_{zi} \quad \text{Deposition (i)}$$

F-change

$$+ R_d L_4 W_4 Z_c f_c \quad V\text{-change}$$

$$- D_{c4} (f_c - f_4) \quad \text{Transference (4)}$$

$$- D_{c5} (f_c - f_5) \quad \text{Transference (5)}$$

$$- K_c V_c Z_c f_c \quad \text{Degradation}$$

...(24)

【0163】

と表される。また、実施形態1における式(15)及び式(14)を、

【0164】

【数25】

$$\frac{df_5}{dt} V_5 Z_5 = \sqrt{D_c/t} A_{a5} Z_5 f_5 \quad V\text{-change}$$

F-change

$$+ (1 - A_c) \frac{n_{0i}}{L_{zi}} v_i V_i Z_i f_i \quad \text{Deposition (i)}$$

$$- D_{c5} (f_5 - f_c) \quad \text{Transference (C)}$$

$$- D_{45} (f_5 - f_4) \quad \text{Transference (4)}$$

$$- K_5 V_5 Z_5 f_5 \quad \text{Degradation}$$

...(25)

【0165】

【数26】

$$\frac{df_4}{dt} V_4 Z_4 = -G V_4 Z_4 f_4 \quad \text{Ventilation}$$

F-change

$$- \sum_{i=1}^3 n_i D_{i4} (f_4 - f_i) \quad \text{Transference (i)}$$

$$- \sum_{j=5}^7 D_{4j} (f_4 - f_j) \quad \text{Transference (j)}$$

$$- K_4 V_4 Z_4 f_4 \quad \text{Degradation}$$

$$- D_{4c} (f_4 - f_c) \quad \text{Transference (c)}$$

… (26)

【0166】

にそれぞれ置換する。

【0167】

式(25)において、V-changeの項はカーペット纖維の体積変化(時間と共に増加)を、Deposition(i)の項は粒子の落下に伴う付着を、Transference(c)の項はカーペット纖維と空間部分との間の化合物の移動量を、Transference(4)の項はカーペット纖維と空気との間における化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化をそれぞれ示している。

【0168】

また、式(26)において、Ventilationの項は化合物の室内からの排出量を、Transference(i)の項は空気と粒子との間の化合物の移動量を、Transference(j)の項は空気と床(カーペット纖維)・天井・壁との間の化合物の移動量を、Degradationの項は化合物の光分解量の変化を、Transference(c)の項は空気と空間部分との間の化合物の移動量を各々示している。

【0169】

従って、S3でのFugacity計算は、実施形態1の式(13)、(16)、(17)、上記(24)ないし(26)の8種の微分方程式をルンゲクッタジル法で解くことによって行われる。その後のS4ないしS17の工程は、実施形態1と同様である。

【0170】

以上のように、本実施形態における有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、床の種類が繊維の穂立ちと穂立ち間の空間部分とを有するカーペットの場合には、大・中・小の3種の粒子、室内空気、床(カーペット繊維)、天井、及び壁におけるFugacityに関する7種の連立微分方程式に、上記カーペットの空間部分のFugacityの微分方程式を加えて、各Fugacityを計算するものである。

【0171】

これにより、空間部分に薬剤が溜まることから平坦な床の場合とは化合物の振る舞いが異なる場合でも、正確に化合物の挙動を予測することが可能となり、多様なシュミレーションが行える。

【0172】

【発明の効果】

以上のように、本発明の請求項1に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、有害生物防除活性化合物を含む溶液を室内空間に噴霧するときに、大・中・小の3種のエアゾール粒子、室内空気、床、天井、及び壁における上記化合物の圧力に関する微分方程式を連立し、微小時間単位を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、連立微分方程式の解に基づいて上記化合物の室内挙動を予測する方法である。

【0173】

これにより、経時的変化を伴うパラメータを含む連立微分方程式を解くときに、マスバランスの変動に合わせて自動的に微小時間単位が設定されるので、微小時間単位が一定値であった従来の方法と比べて、コンピュータで上記微分方程式

を処理する場合に、短時間で正確な解を得ることが可能となるという効果を奏する。

【0174】

請求項2に記載の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法は、請求項1に記載の方法に加えて、上記床の種類が繊維の穂立ちを有する敷物の場合には、上記連立微分方程式に上記敷物の条件に基づく微分方程式を加える方法である。

【0175】

これにより、床上に繊維の穂立ちを有する敷物を敷いている場合でも、正確に化合物の挙動を予測することが可能となり、多様なシミュレーションが行うことができるという効果を奏する。

【0176】

請求項3に記載の有害生物防除活性化合物の安全性評価方法は、請求項1に記載の室内挙動予測方法による予測結果に基づいて、上記化合物の室内挙動を予測し、その後、上記予測結果に基づいて上記溶液を空間噴霧した際の上記化合物の人体に対する安全性を評価する方法である。

【0177】

これにより、短時間、かつ精度良く、有害生物防除活性化合物の人体に対する安全性を評価することができるため、上記化合物を含む殺虫剤等の薬剤を処方する際に、条件を変えて容易にシミュレーションを繰り返すことができ、安全性が高く目的に応じた薬剤を処方し易くなるという効果を奏する。

【0178】

尚、請求項4に記載したように、有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法をコンピュータプログラムとして実現することもできる。

【図面の簡単な説明】

【図1】

本発明にかかる実施の形態1の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測方法及びそれを用いて人体に対する安全性を評価する安全性評価方法を示すフローチャートである。

【図2】

上記化合物の室内挙動予測を行うときの室内環境のモデル化状態を示す説明図である。

【図3】

(a) は室内空气中濃度の経時的変化を示すグラフであり、(b) は上記グラフを用いて平均室内空气中濃度を求める場合の説明図である。

【図4】

(a) は床残留量の経時的変化を示すグラフであり、(b) は上記グラフを用いて平均床残留量を求める場合の説明図である。

【図5】

本発明にかかる実施の形態2の有害生物防除活性化合物の室内挙動予測を行うときのカーペットのモデル化状態を示す説明図である。

【図6】

予測刻み時間幅の設定方法を示すフローチャートである。

【図7】

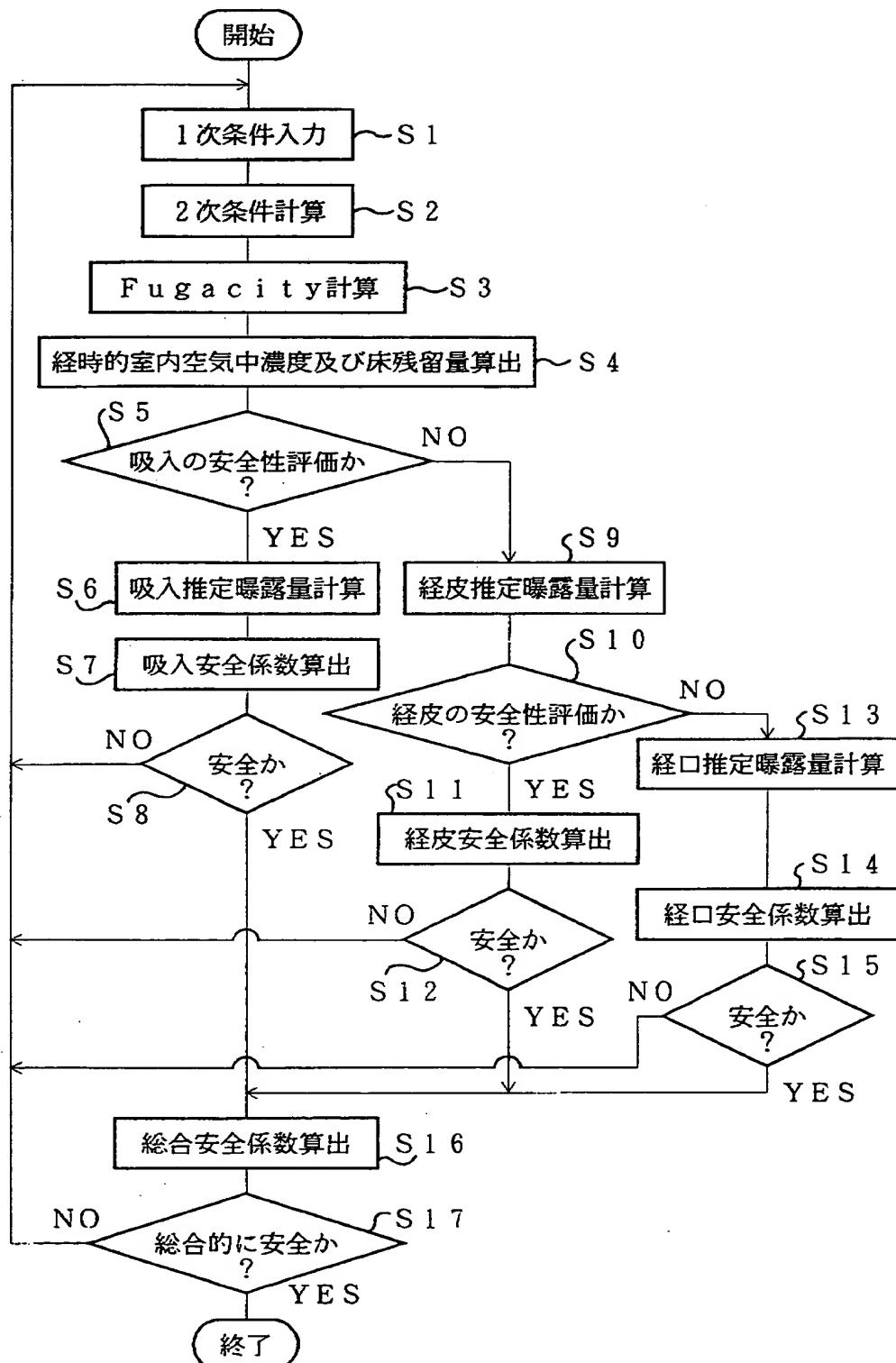
典型的な部屋のサイズ例を示すと共に、空気の流れを示す説明図である。

【符号の説明】

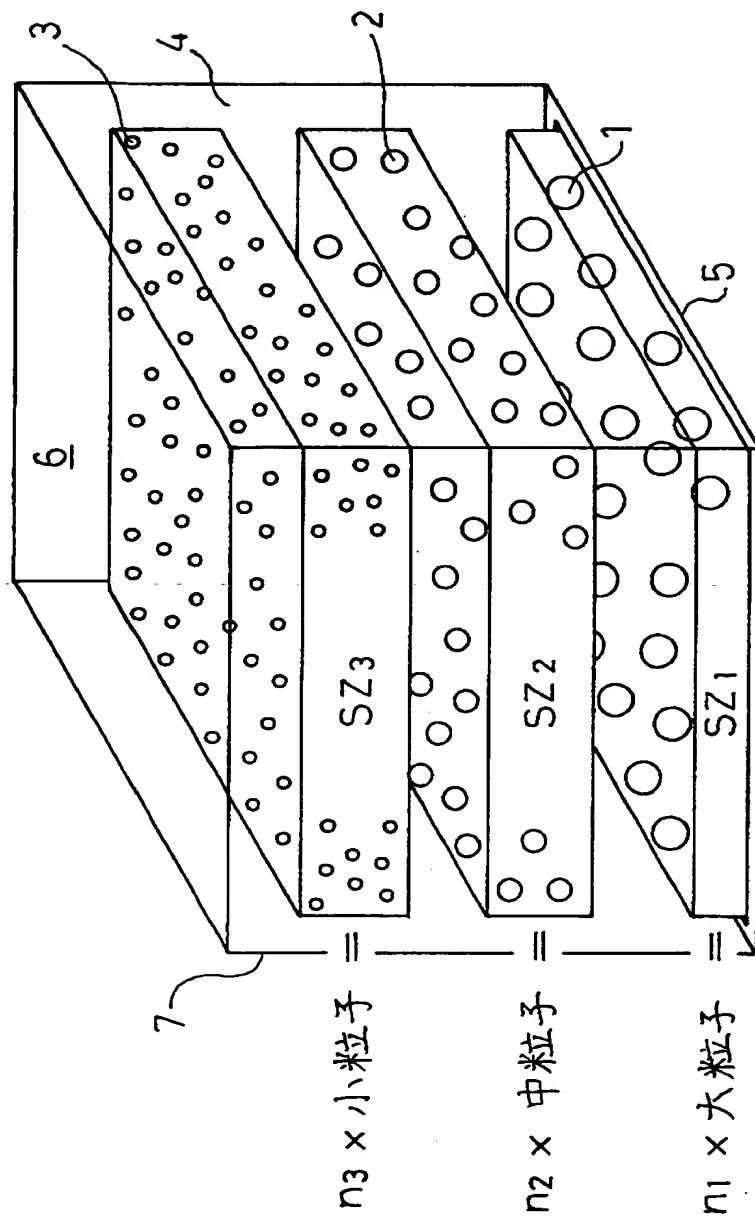
- 1 大粒子（エアゾール粒子）
- 2 中粒子（エアゾール粒子）
- 3 小粒子（エアゾール粒子）
- 4 空気
- 5 床
- 6 天井
- 7 壁

【書類名】 図面

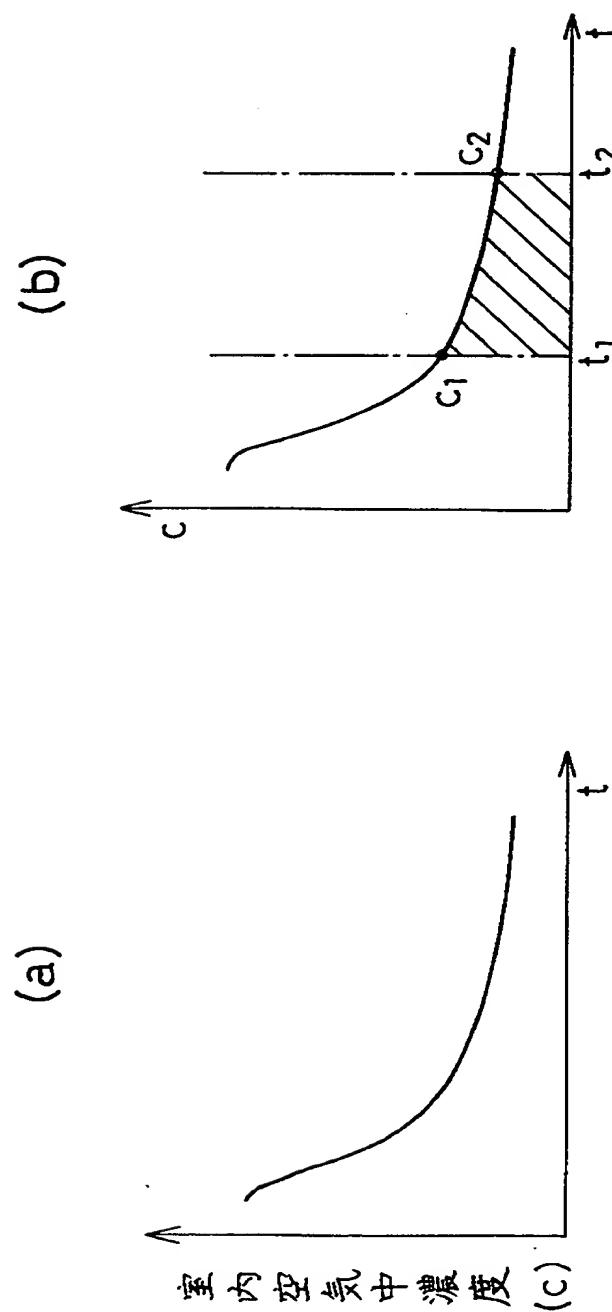
【図1】



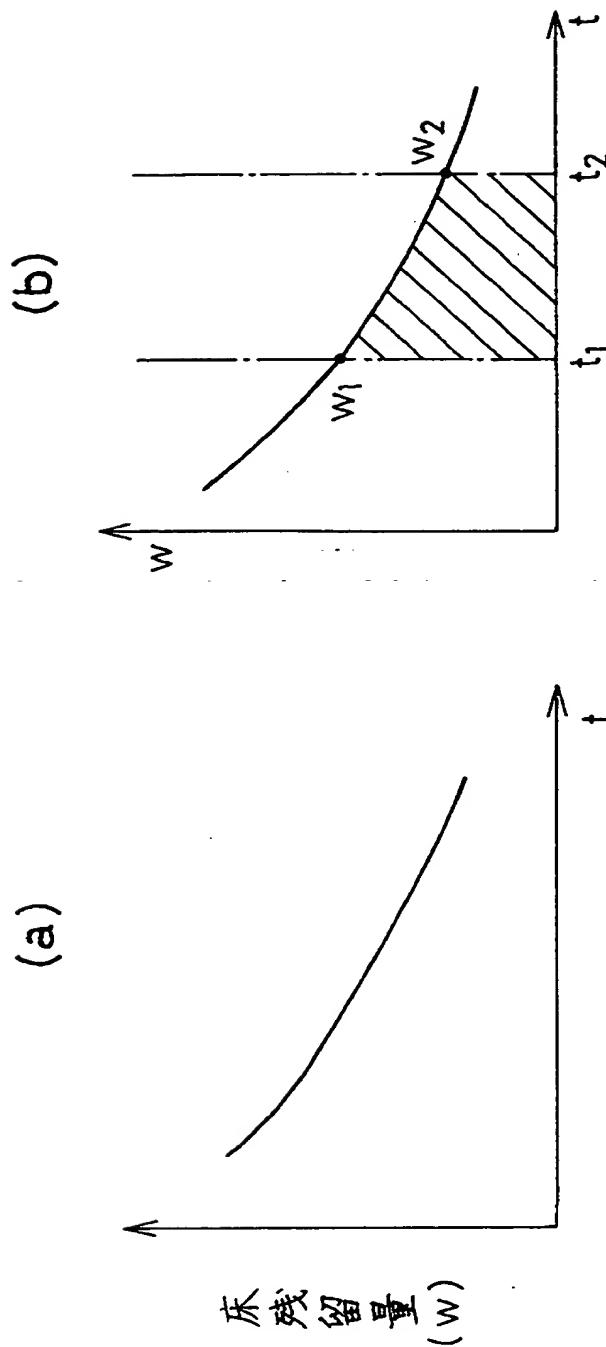
【図2】



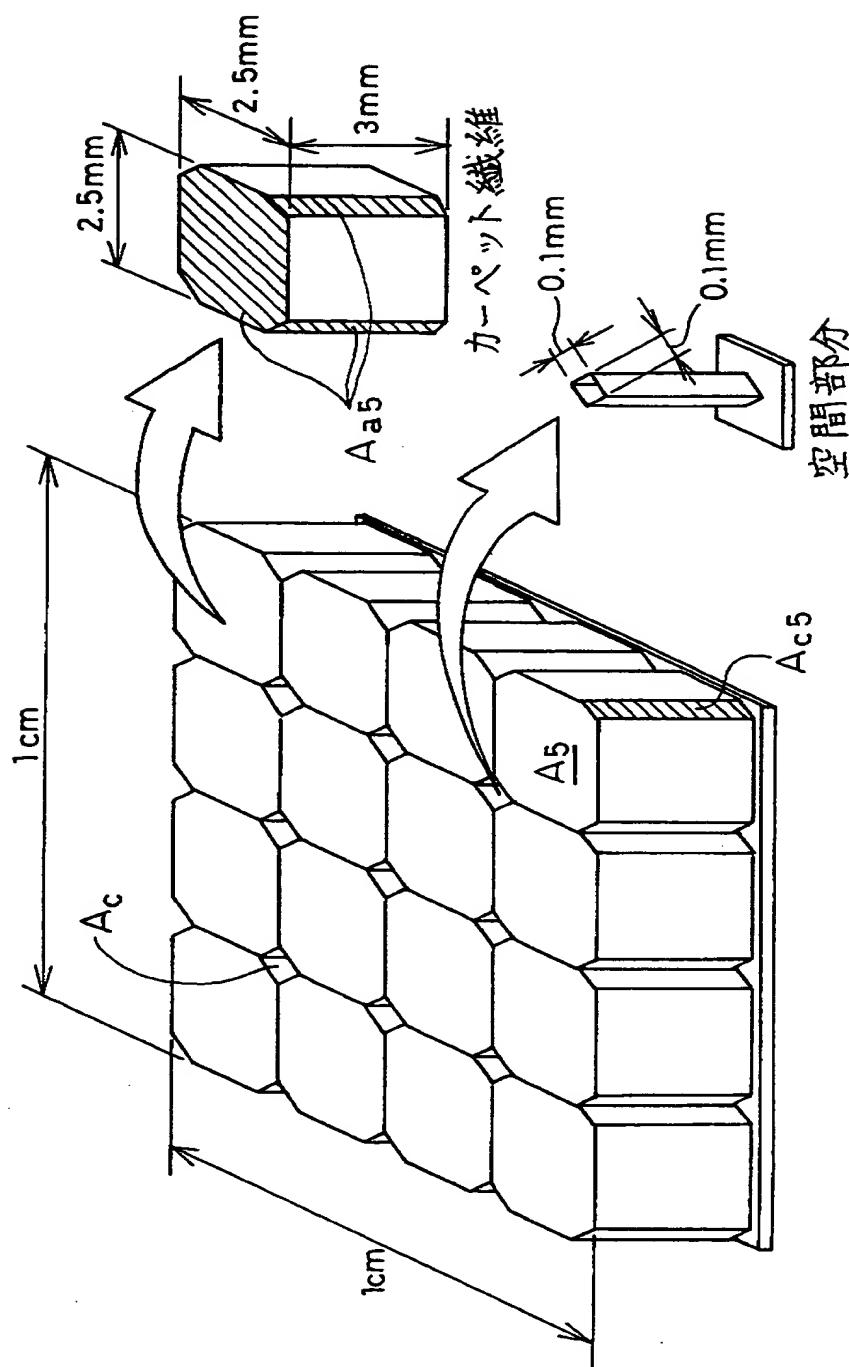
【図3】



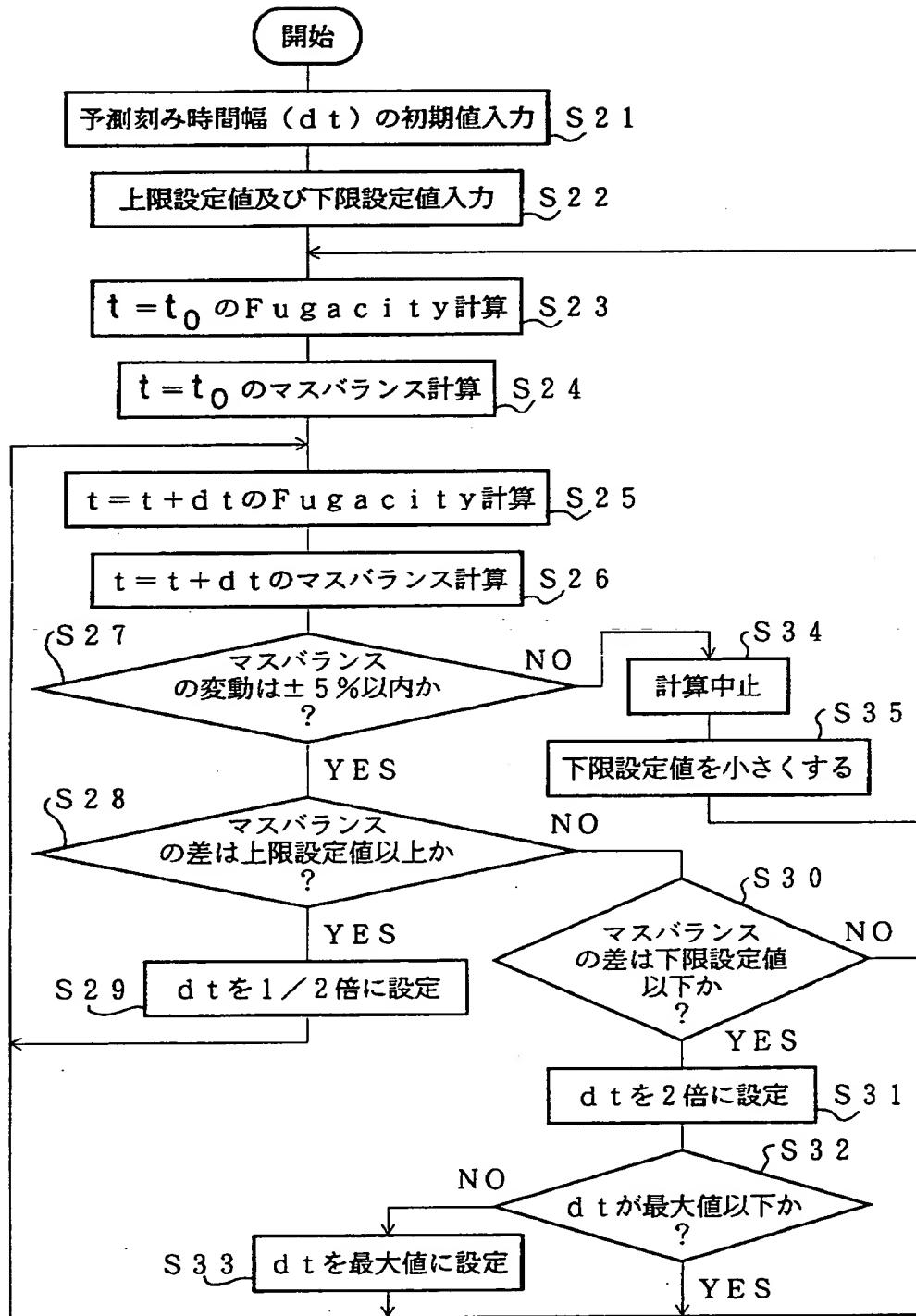
【図4】



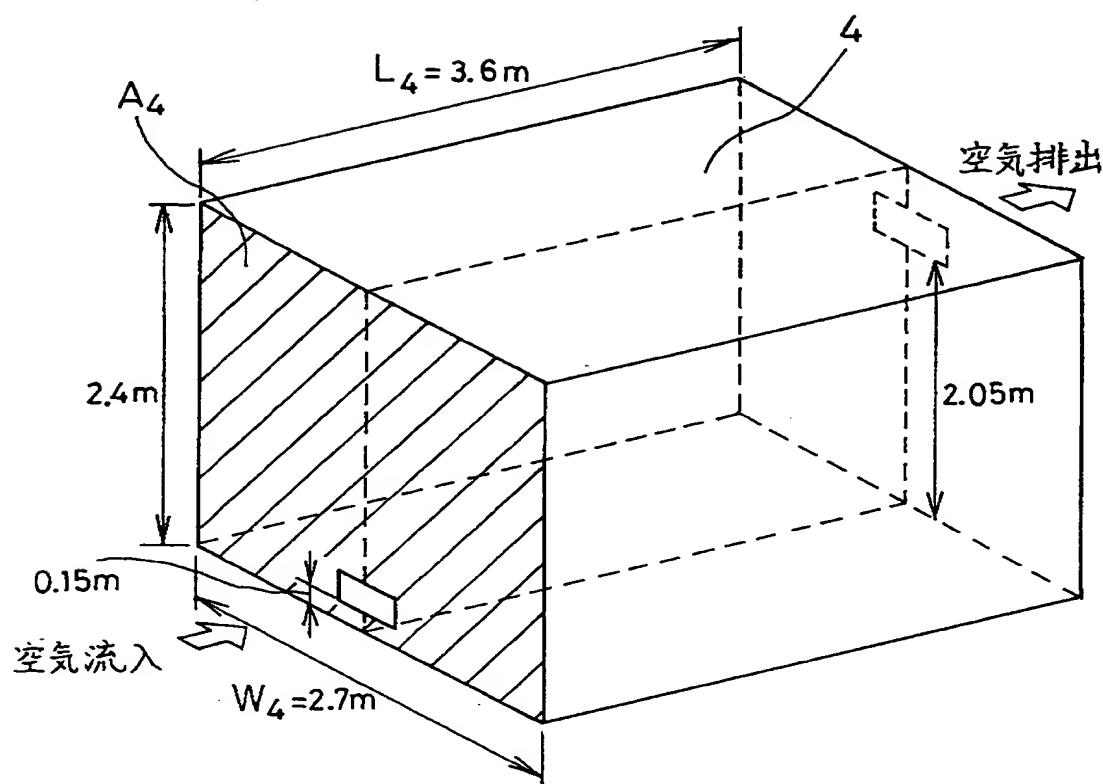
【図5】



【図6】



【図7】



【書類名】 要約書

【要約】

【課題】 有害生物防除活性化合物を含む薬剤を室内空間に噴霧したときの化合物の室内挙動を予測する場合に、予測刻み時間幅が自動的に設定されることによって、連立微分方程式を短時間かつ正確に処理する。

【解決手段】 有害生物防除活性化合物の性質、室内環境、製品の条件、及び噴霧条件等の1次条件を入力し（S1）、それらに基づいて大・中・小の3種のエタゾール粒子、室内空気、床、天井、及び壁における化合物のFugacityに関する微分方程式を連立する。予測刻み時間幅を、上記化合物の室内投入量と得られた解とが合致するように、噴霧後の室内における化合物のマスバランスを常に確認しながら可変させて設定することによって上記連立微分方程式を解き、各Fugacityを計算する（S3）。Fugacityに基づいて、室内空气中濃度や床残留量を算出し、上記化合物の室内挙動を予測する（S4）。

【選択図】 図1

【書類名】 職権訂正データ
【訂正書類】 特許願

〈認定情報・付加情報〉

【特許出願人】

【識別番号】 000002093

【住所又は居所】 大阪府大阪市中央区北浜4丁目5番33号

【氏名又は名称】 住友化学工業株式会社

【代理人】

【識別番号】 100080034

【住所又は居所】 大阪府大阪市北区天神橋2丁目北2番6号 大和南

森町ビル 原謙三國際特許事務所

【氏名又は名称】 原謙三

出願人履歴情報

識別番号 [000002093]

1. 変更年月日 1990年 8月28日

[変更理由] 新規登録

住 所 大阪府大阪市中央区北浜4丁目5番33号

氏 名 住友化学工業株式会社

THIS PAGE BLANK (use to)